

1.	ÚVOD . . . . .	7
2.	PRINCIPY KVANTOVÉ MECHANIKY . . . . .	9
2.1	Stav soustavy. Vlnová funkce . . . . .	9
2.2	Měřitelné veličiny. Operátory . . . . .	10
2.3	Tvar operátorů. Komutativnost a princip neurčitosti . . . . .	16
2.4	Časová změna stavu . . . . .	21
2.5	Některé filozofické aspekty . . . . .	22
3.	SPIN A PAULIHO PRINCIP . . . . .	25
3.1	Spin částice . . . . .	25
3.2	Vlnová funkce soustavy identických částic . . . . .	27
4.	STACIONÁRNÍ STAV . . . . .	29
4.1	Nečasová Schrödingerova rovnice . . . . .	29
4.2	Variační princip . . . . .	31
5.	ZÁKLADNÍ APROXIMACE UŽÍVANÉ V KVANTOVÉ CHEMII . . . . .	33
5.1	Hamiltonián pro molekulu v nerelativistickém přiblížení . . . . .	33
5.2	Separace pohybu jader . . . . .	34
5.3	Bezrozměrné vyjádření kvantově mechanických veličin . . . . .	37
6.	MATEMATICKÝ APARÁT KVANTOVÉ CHEMIE . . . . .	39
6.1	Vektory a matice . . . . .	39
6.2	Přechod od jedné báze funkcí k jiné . . . . .	43
6.3	Nalezení vlastních funkcí operátoru . . . . .	44
6.4	Komutativnost operátoru a faktorizace matic . . . . .	48
7.	VÍCEELEKTRONOVÉ FUNKCE . . . . .	50
7.1	Volba N-elektronové báze . . . . .	50
7.2	Elektronová konfigurace a konfigurační interakce . . . . .	53
7.3	Matice hustoty a orbitaly . . . . .	58
8.	JEDNOELEKTRONOVÉ FUNKCE . . . . .	63
8.1	Hartree-Fockovy orbitaly . . . . .	63
8.2	Fyzikální smysl HF rovnic . . . . .	74
8.3	Vlastnosti kanonických HF orbitalů . . . . .	76



9.	VOLBA JEDNOELEKTRONOVÉ BÁZE . . . . .	79
9.1	Atomové orbitaly . . . . .	79
9.2	Slaterovy orbitaly . . . . .	81
9.3	Gaussovy orbitaly . . . . .	83
9.4	Kontrahované orbitaly . . . . .	84
9.5	Potřebný rozsah báze . . . . .	85
9.6	Orbitaly neležící na jádrech atomů . . . . .	87
9.7	Problém neorthogonalit atomových orbitalů . . . . .	88
10.	MOŽNOSTI URYCHLENÍ VÝPOČTŮ . . . . .	91
10.1	Výpočet vlastností molekuly (krátké shrnutí) . . . . .	91
10.2	Poruchová teorie . . . . .	93
10.3	Symetrie molekul . . . . .	98
11.	SEMIEMPIRICKÉ METODY . . . . .	101
11.1	Obecná charakteristika semiempirických metod . . . . .	101
11.2	Metody zahrnující pouze valenční elektrony . . . . .	102
11.3	$\pi$ -elektronová aproximace . . . . .	103
11.4	Zanedbání diferenciálního překryvu . . . . .	104
11.5	Metody neuvažující explicitně elektronovou repulsi . . . . .	108
12.	PŘEHLED NĚKTERÝCH SEMIEMPIRICKÝCH METOD . . . . .	110
12.1	CNDO . . . . .	110
12.2	Metoda PPP . . . . .	112
12.3	Metoda EHT . . . . .	113
12.4	Hückelova metoda . . . . .	113
12.5	Některé další semiempirické metody . . . . .	115